

# HOKUSAI BigWaterfall2 (HBW2) トライアル運用説明会

情報統合本部  
情報システム部

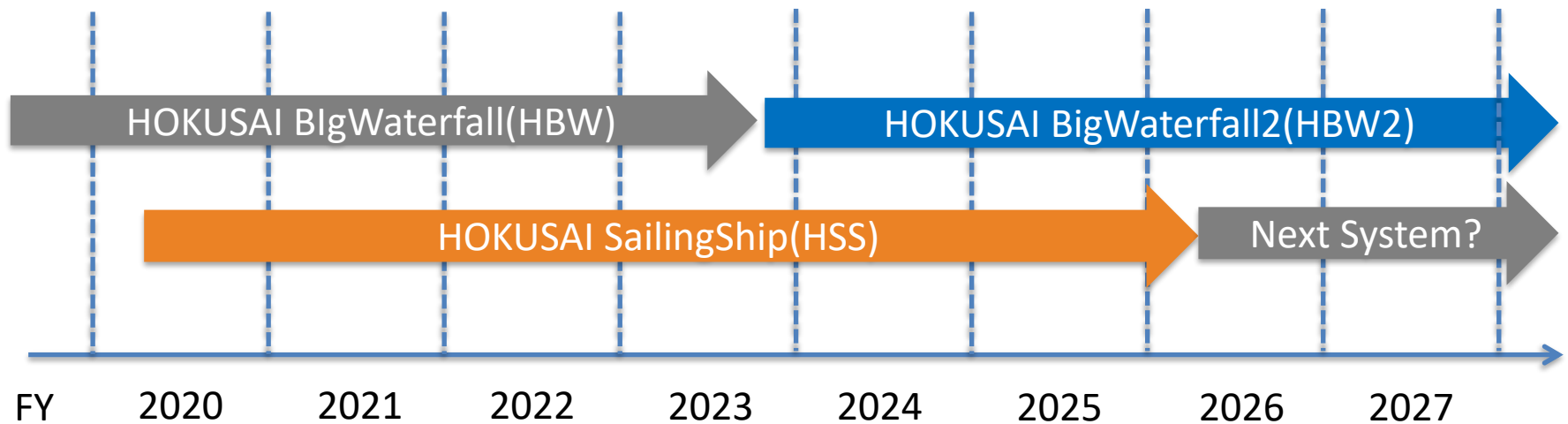
## 本日の概要

- HBW2システムの概要
- HBW2のHPCIへの資源提供
- HBW2システムの運用方針
  - トライアル運用、本運用、利用負担金
- HBW2トライアル運用の利用方法
  - HBW2ポータルでのユーザ登録と課題申請
  - HBW2ログインノードでのジョブ実行

## HBW2の概要

# 共同利用計算機運用スケジュール

- スーパーコンピュータ
  - 2017年10月～2023年11月 : HOKUSAI BigWaterfall(HBW)
    - 2023年7月末でMPCの半分は運用終了
  - 2023年12月～2029年11月 : HOKUSAI BigWaterfall2 (HBW2)
    - 2024年3月末まではトライアル運用
- データ科学基盤
  - 2020年6月～2026年5月 : HOKUSAI SailingShip(HSS)



# HBWの運用終了とHBW2の運用開始

- HBWの運用終了

- 11月27日(月)午前9時まで
- 利用負担金と演算時間追加申請
  - 11月7日まで
- 利用報告書受付
  - 11月28日 午後5時まで
  - 継続希望のチェックボックスは無効

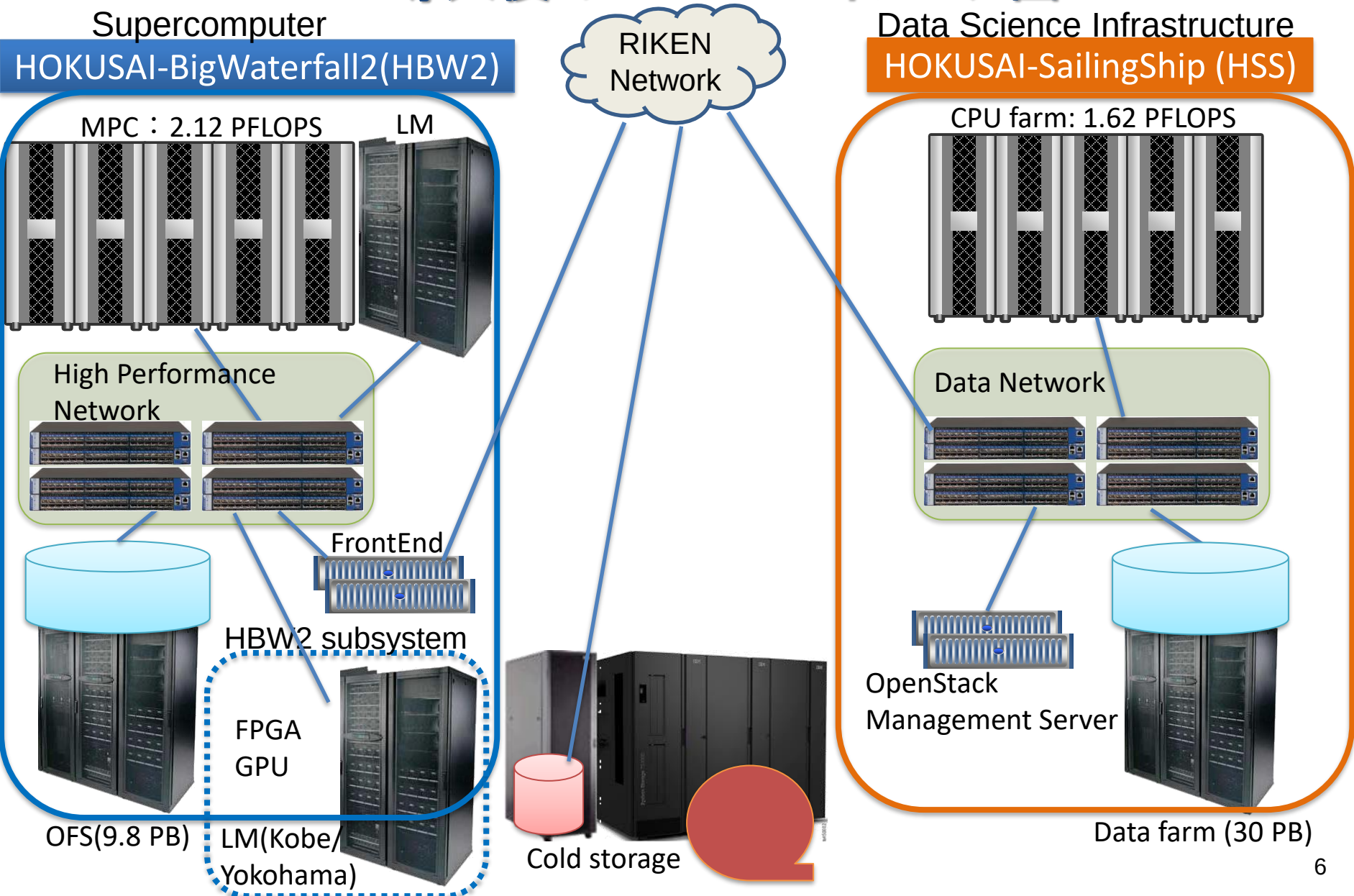
- HBW2のトライアル運用運用開始

- 12月4日(月)午後1時から
  - 利用申請も同じタイミングでHBW2ポータル上で受付開始
  - トライアル運用は2024年3月末まで
  - 本運用は2024年4月から
- HBW2トライアル運用説明会
  - 11月22日(水)10時から

# HBW2導入後のHOKUSAIイメージ図

## Supercomputer HOKUSAI-BigWaterfall2(HBW2)

## Data Science Infrastructure HOKUSAI-SailingShip (HSS)



# HBW2システム

- MPC全体
  - 総理論FP(64bit)演算性能: 2.12 PFLOPS
- ノード性能
  - 理論FP(64bit)演算性能: 6.8 TFLOPS
    - Intel Xeon 次期CPU(1.9 GHz, 56コア) x 2
  - メモリ
    - HBM2e: 128 GiB、3260 GB/s
- 高速ネットワーク(HPN)
  - Infiniband NDR: 50 GB/s
    - MPCを含むノード間はフルバイセクションの4分の1
    - それ以外はフルバイセクション
- 共有ストレージ
  - Lustre ファイルシステム: 9.8 PB、400 GB/s
- 大容量メモリサーバ(LMC)
  - 2ノード、3 TiB/ノード

# HBWとHBW2の比較

|              | HBW                | HBW2                      |
|--------------|--------------------|---------------------------|
| FLOPS        | 2.5 P              | <u>2.12 P</u>             |
| 全コア数         | <u>33,600</u>      | <u>34,944</u>             |
| ノード数         | 840                | 312                       |
| メモリ          | 96 GiB、255 GB/s    | 128 GiB、 <u>3260 GB/s</u> |
| 大容量メモリサーバ群   | 2ノード、1.5 TiB/ノード   | 2ノード、3 TiB/ノード            |
| 通信性能         | IB EDR (12.5 GB/s) | IB NDR (50 GB/s)          |
| 共有ストレージ      | 5 PB               | 9.8 PB                    |
| コンテナによるジョブ実行 | なし                 | Singularity               |

HBW2サブシステムを別途調達中

- 和光：GPUサーバとFPGAサーバ
  - GPUサーバ4ノード：H100 x 4
  - FPGAサーバ2ノード：IA-840F x 2
- 神戸/横浜：大容量メモリサーバ
  - 各1ノード：8 TiB
- 2024年4月運用開始予定



## HBW2のHPCIへの資源提供

# HPCIについて

## ◎High-Performance Computing Infrastructure (HPCI)

- 国内の大学や研究機関の計算機システムやストレージを高速ネットワークで結んだ共用計算環境基盤
- 全国のHPCIリソースを全国の幅広いHPCユーザー層が効率よく利用できる科学技術計算環境を実現のため
- 各研究者はHPCI運営機関への利用申請、課題審査を経て採択されることでHPCI資源が利用可能

## ◎HPCI計算資源

### ◆第一階層

- ・富岳

### ◆第二階層

- ・全国の大学や研究機関の計算資源

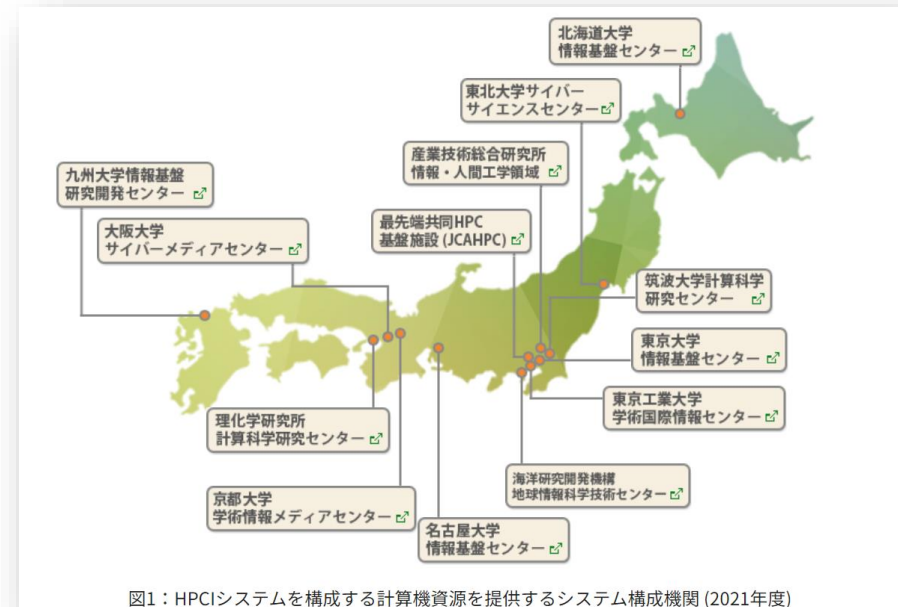


図1：HPCIシステムを構成する計算機資源を提供するシステム構成機関（2021年度）

# HBW2のHPCIへの資源提供

五神理事長より、HBW2の調達開始に当たって、以下の方針が示されました。

- HPCIへの積極的な関与とその利用促進すること。
- HBW2をHPCIシステムへ資源提供すること。
- これらの施策を実施しつつ、将来的に理研としての計算資源がどうあるべきかの検討を行うこと。

**TRIP構想**を進める上でも、理研の研究者が利用できる計算資源の多様化や様々な研究者との連携を目指すために、以下を目的とします。

- 計算資源の選択肢としてHPCI計算資源を考慮できるようにする。
- 一方的に利用するだけでなく、HPCIに資源提供も含めて積極的に関わっていく。

## 実施策

### 1. HBW2のHPCIへの資源提供

- 2024年度募集分よりHBW2をHPCI資源として提供（2024年度分は締切済）

### 2. 富岳の有償利用枠の積極的利用

- 富岳の有償課題の利用料の全額補助（締切済）

# HBW2の運用方針

## HBW2トライアル運用

- 2023年12月から2024年3月までをトライアル運用とする
  - トライアル運用ではHBWとは別に利用申請が必要
  - トライアル運用の利用報告書と利用負担金はなし
- 利用区分
  1. (理研内)課題
    - 各課題はそれぞれMPCの全演算資源の5%を利用可
    - 演算時間を使い切った場合優先度低で実行可
    - 大容量メモリサーバは20%まで追加可
- ストレージ(本運用も同じ)
  - ホーム領域(/home)はアカウント単位で4TB
  - データ領域(/data)は課題単位で申請量を割当
- HBWからHBW2へのデータ移行
  - HBWのデータ(ホーム領域とデータ領域)はHSSにバックアップ取得中
  - HSSからHBW2へはトライアル運用中に(scpなどで)利用者自身で移動

## HBW2本運用

- 2024年4月から本運用開始
- 利用区分
  1. (理研内)課題
    - 各課題はそれぞれMPCの全演算資源の1%を無償で利用可
    - 有償で追加可
    - 演算時間を使い切った場合、優先度低で無償で利用可
    - 大容量メモリ/GPU/FPGAサーバは20%まで追加可
  2. HPCI課題
    - **HPCIに50%程度の演算時間を提供予定**
      - 各課題は最大10%
    - 利用者はHPCI課題を申請し、採択されれば利用可能
      - 利用者による利用負担金の負担はなし(HPCIから理研に支払い)

1%以下の利用は今まで通り利用可能

1%を超える利用はHPCI課題、有償利用か優先度低で実行

# HBW2利用負担金

- HBW2本運用が開始する2024年4月から適用予定
  - HSSは変更なし
- HBW2の演算時間は**720コア時間で300円**
  - 理研内課題は全演算資源の1%の利用と低優先度での利用は無償
  - HPCI課題は利用者負担なし
  - 例: 1ノード(112コア)1年間分(約97万コア時間)の追加で403,200円
    - $112\text{コア} \times 24\text{時間} \times 360\text{日} / 720\text{コア時間} \times 300\text{円} = 403,200\text{円}$
- HBW2のデータ領域は**1TBを1月の利用で180円**
  - アカウント毎のホーム領域(4TB)は無償
  - 例: データ領域を10TBを1年間確保すると21,600円
    - $10\text{TB} \times 12\text{ヶ月} \times 180\text{円} = 21,600\text{円}$

\*利用負担金は、HBW2の年間支払い総額の25%程度を利用負担金で充当するように設定

HBW2の年間支払い総額は3億円程度

- ハードウェアのリース代、保守・サポート代など
- 場所代や電気代などは含まない

# HBW2の利用者管理

- **HBW2ポータルユーザ**
  - HBW2ポータルに初回ログイン時に作成
  - HBW2ポータルの利用や課題メンバーになるために必要
- **HBW2アカウント**
  - 課題参加時に作成
  - Linuxアカウントで計算リソースやストレージの利用に必要
- **HPCI関連**
  - HPCI ID: HPCI課題申請に必要
  - HPCIアカウント: HPCI支援システムなどへのログイン用
    - HPCI課題採択後に作成
  - ローカルアカウント: 各計算資源のアカウント
    - HBW2の場合はHBW2アカウント



# HBW2ポータル

- HBW2ポータル
  - HBWのオンライン申請システムとHPCポータルを統合
  - 課題申請だけでなく利用状況も確認可能に
  - 理研の研究者はShibboleth認証でログイン
- HBW2ポータルの機能
  - 各種情報
    - お知らせ、利用手引書、システム状態
  - 利用者管理
    - HBW2ポータルユーザ登録
    - HBW2アカウントについてsshの公開鍵登録
  - 課題管理
    - 新規課題申請
    - 各種申請
      - 課題情報変更
      - 課題メンバー変更
      - コア時間/ストレージ購入申請
    - 利用報告書提出
    - 次年度課題利用申請

# HBW2トライアル運用利用方法

# HBW2トライアル運用の利用手順

## 1. HBW2ポータルでの利用準備

- i. 課題メンバー全員がHBW2ポータルでユーザ作成
- ii. HBW2ポータルで新規課題申請
  - 利用規約や運用実施手順は本運用開始までに更新予定
  - 非居住者などの安全保障輸出管理の審査
    - 該否証明書など準備中なので、後日審査
    - 理研入所時の審査票に追記する形を想定
  - 問題なければ課題とHBW2アカウント登録
- iii. 課題メンバーがそれぞれsshの公開鍵を登録

## 2. HBW2ログインノードでのジョブ実行

- i. sshでHBW2のログインノードにログイン
- ii. ソフトウェアのコンパイルや環境設定を行いジョブを実行
  - HBW2からはジョブマネージャーとしてslurmを導入
  - Singularityのジョブも実行可

HBW2ポータルなど運用も含めてトライアルとご理解ください

# HBW2ポータルでのユーザ作成

- HBW2ポータルの初回ログイン時にユーザ作成
  - 理研の研究者はShibboleth認証でログイン
  - 必要な項目を入力した後で登録を押せばユーザ作成完了
    - HBW2メールアドレスはShibboleth認証時に自動的に取得
    - 連絡用メールアドレスは連絡用に追加したいメールアドレス

画面は開発中のもの

お知らせ 利用手引き

ログイン

HOKUSAI BigWaterfall 2 Portal

## HBW2ポータルユーザ作成

下記の情報をHBW2ポータルへ登録します。

|             |                                                                                                                                                  |
|-------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 理研ID        | 999999                                                                                                                                           |
| 氏名          | 理研 太郎                                                                                                                                            |
| Name        | Riken Taro                                                                                                                                       |
| HBW2メールアドレス | riken.taro@riken.jp                                                                                                                              |
| 連絡用メールアドレス  | <div> <div>-</div> <input type="text" value="連絡用メールアドレスを入力"/> </div> <div> <div>+</div>                     連絡用メールアドレスを追加                 </div> |
| 理研の所属*      | --- 選択してください ---                                                                                                                                 |
| 理研の職制*      | 理研の職制を入力してください                                                                                                                                   |
| 居住性*        | --- 選択してください ---                                                                                                                                 |

\*入力必須項目

登録

# HBW2ポータルで新規課題申請

- HBW2ポータルの新規課題申請メニューから申請
  - 課題メンバーはHBW2ポータルユーザをあらかじめ作成
    - 後日課題メンバーを追加することも可能
  - 必要な項目を入力した後で申請を押せば申請完了
    - HBW利用者もHBW2アカウントは新規を選択

画面は開発中のもの

お知らせ 利用手引き

ログイン中：理研 太郎1 ログイン履歴 ログアウト

HOKUSAI BigWaterfall 2 Portal

一般メニュー

ユーザ情報

新規課題申請

申請一覧

システム状態

公開鍵登録

課題管理メニュー

課題情報管理

課題メンバー管理

計算資源管理

その他の申請

利用報告書提出

## 新規課題申請

|          |                                            |           |
|----------|--------------------------------------------|-----------|
| 課題代表者*   | 既存 ▼                                       | HBW2アカウント |
| 課題名(英語)* |                                            |           |
| 課題名(日本語) |                                            |           |
| 所属の情報*   | --- 選択してください --- ▼                         |           |
| 研究分野*    | --- 選択してください --- ▼                         |           |
| 研究概要*    |                                            |           |
| 備考       |                                            |           |
| 課題メンバー   | - 課題代表者代理 ▼         既存 ▼         HBW2アカウント |           |
|          | + 課題メンバーを追加                                |           |

\*入力必須項目

※ HPCI課題の登録は管理者が行います。利用者の方が申請頂く必要はありません。

申請

# HBWのデータの引き継ぎ方法

- HBWからHBW2へのデータ移行
  - HBWのデータ(ホーム領域とデータ領域)はHSSにバックアップ取得中
  - HSSからHBW2へはトライアル運用中に(scpなどで)利用者自身で移動
  - データを引き継ぐ場合はHSS上のデータにRead onlyでアクセス可に設定
- HBWのホーム領域(/home)データの引き継ぎ方法
  - HBW2アカウント新規作成時に、HBWと同じアカウント名を記入
    - HBWのアカウントと同一人物でなければ、同じアカウント名は使用不可
    - HBWのアカウント名から変更して引き継ぐ場合は、備考欄にその旨記入
- HBWのデータ領域(/data)データの引き継ぎ方法
  - HBW2トライアル課題申請時に、備考欄に引き継ぎたいHBWのプロジェクト名を記入
    - HBWの課題と代表者と異なる場合は、HBWの課題の代表者に確認します

注意：データの引継ぎ方法は若干変更する可能性があるので、HBW2ポータル上の指示に従ってください。

# HBW2でのジョブ実行環境

- HBW2のジョブ管理
  - HBW2からはジョブマネージャーとしてslurmを導入
  - Singularityイメージのジョブも実行可
- Singularityイメージの用意
  - 配布されているSingularityイメージ
  - dockerイメージをSingularityイメージに変換
  - Singularityイメージを自作
- HBW2で用意しているアプリケーション
  - Gaussian, GAMESS
  - Gromacs, AMBER, NAMD, VMD
- 計算ノードのハイパースレッドの設定
  - 基本的にはHBWと同様ハイパースレッドオフ
  - テスト的に一部ノードはハイパースレッドオン